

# Evaluación de propiedades electrónicas de $\text{TiO}_2(\text{B})$ dopado con carbono mediante DFT+U

Herman Heffner<sup>1</sup>, Alejandro González Fá<sup>1</sup>, Ricardo Faccio<sup>2</sup>, Ignacio López Corral<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Química del Sur (INQUISUR), Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, Bahía Blanca, Argentina.

<sup>2</sup> Centro Nano-Mat, Cryssmat-Lab, DETEMA, Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Cno. Saravia s/n, Pando, Uruguay.



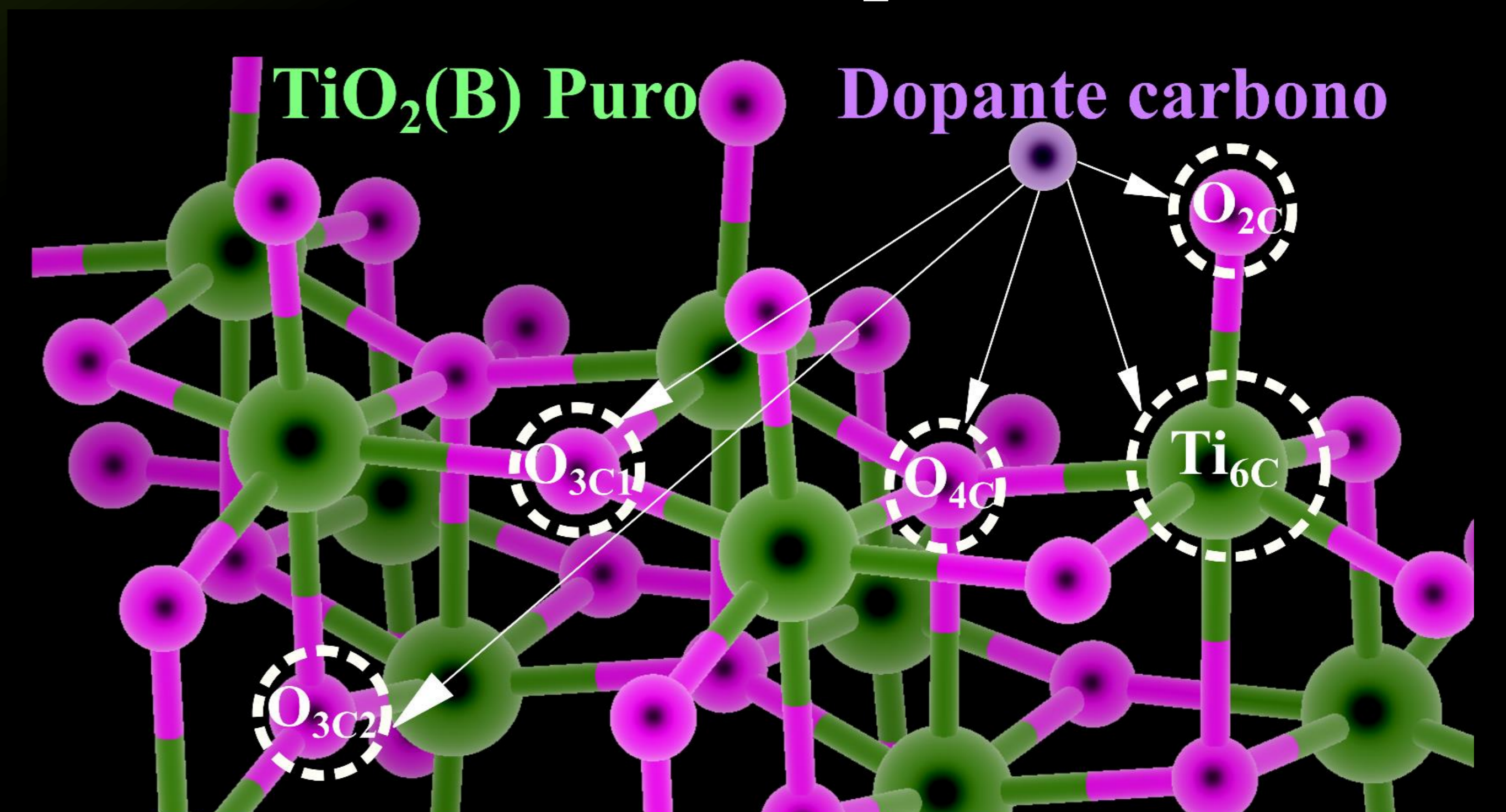
INQUISUR

## Introducción

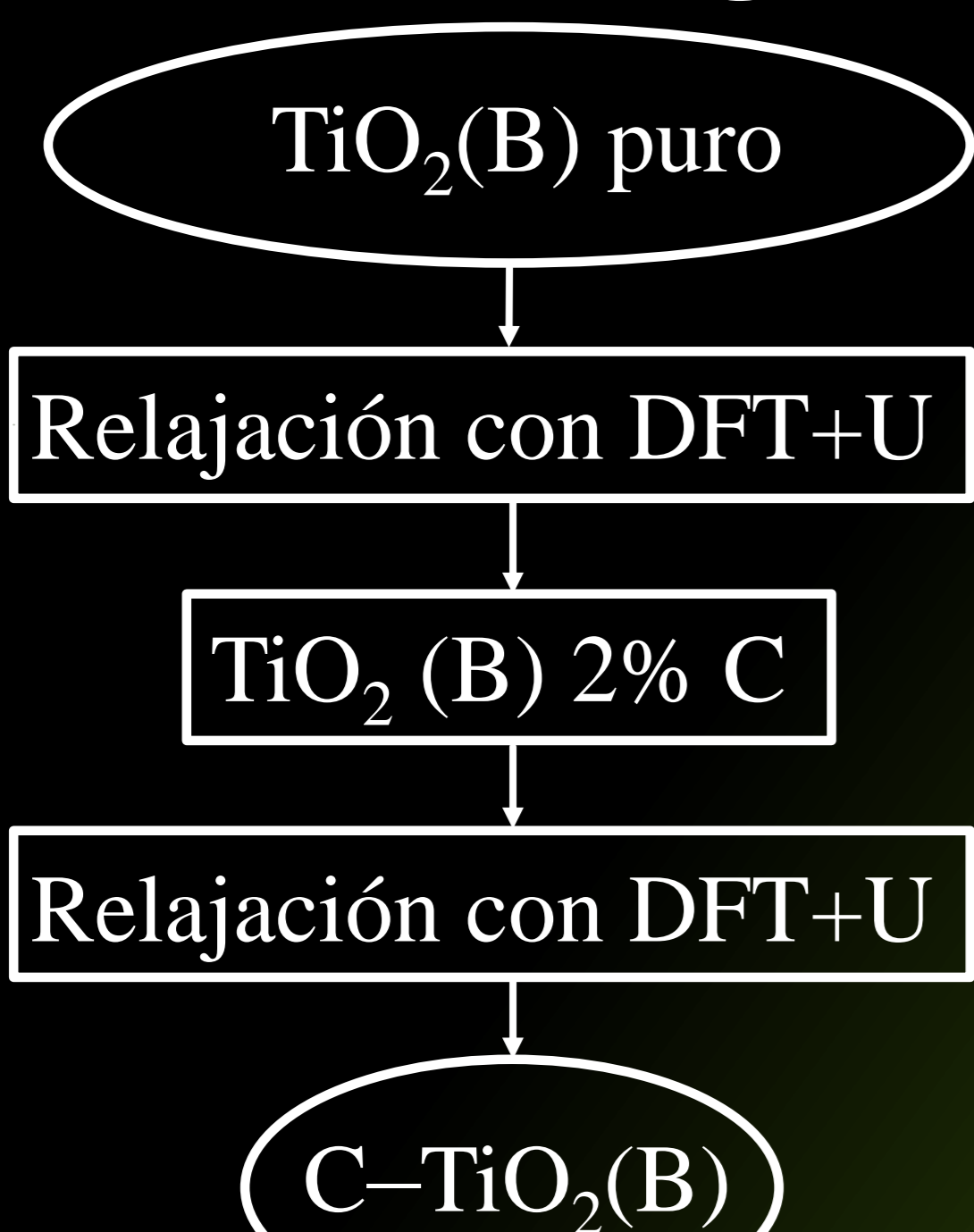
El valor de energía de banda prohibida del dióxido de titanio puede disminuirse significativamente mediante el dopado con carbono [1], obteniéndose  $\text{C-TiO}_2$ . Luego del proceso de dopaje, la absorción se ve incrementada de manera significativa, indicando así, un cambio en sus propiedades electrónicas.

El objetivo del presente trabajo es modelar la incorporación de carbono en el polimorfo B de dióxido de titanio mediante la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Para ello se obtuvieron las geometrías preferenciales tanto para la sustitución del titanio como para los cuatro tipos de oxígenos, y luego se evaluaron sus propiedades electrónicas.

## Celda C- $\text{TiO}_2(\text{B})$

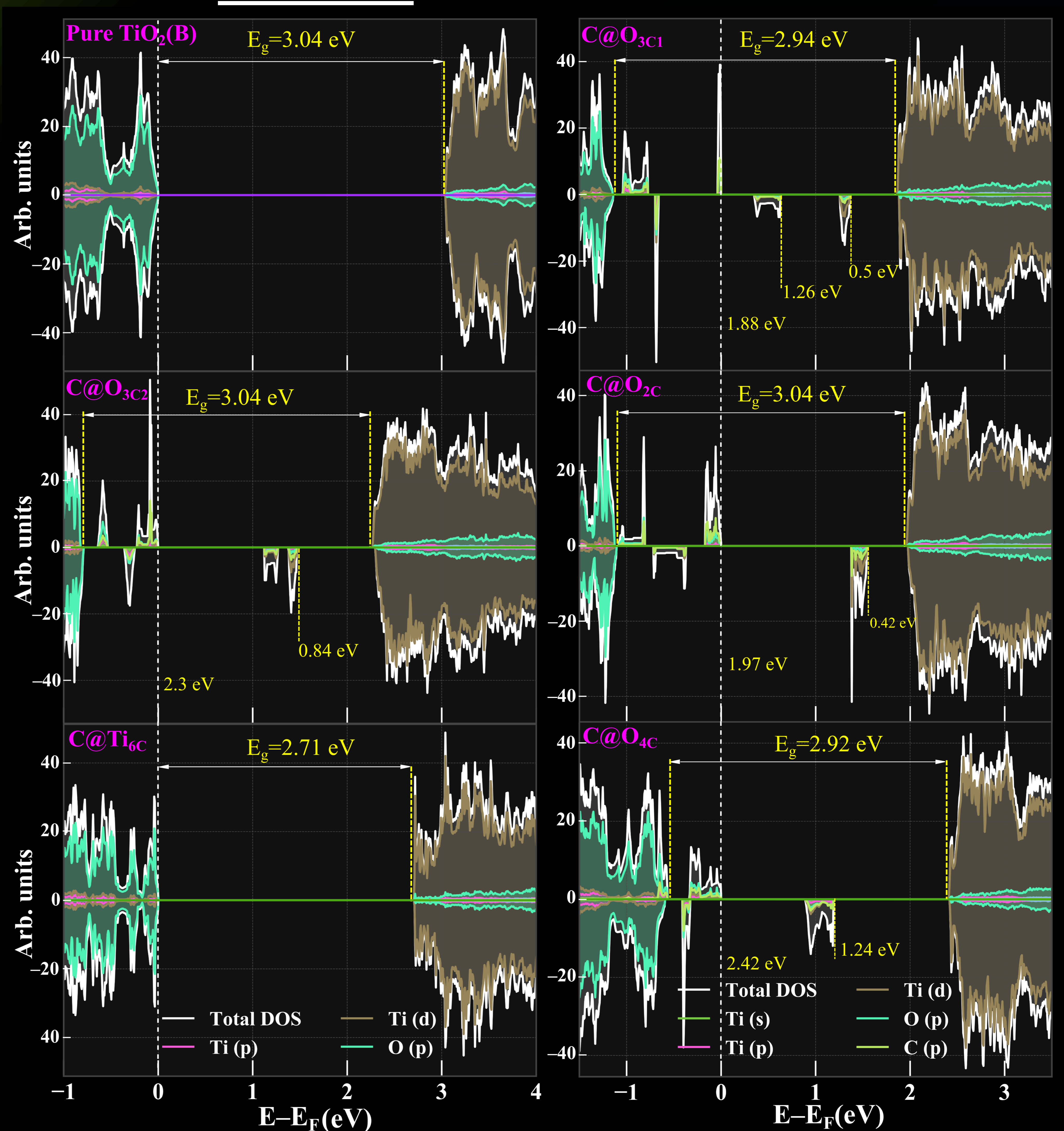


## Metodología

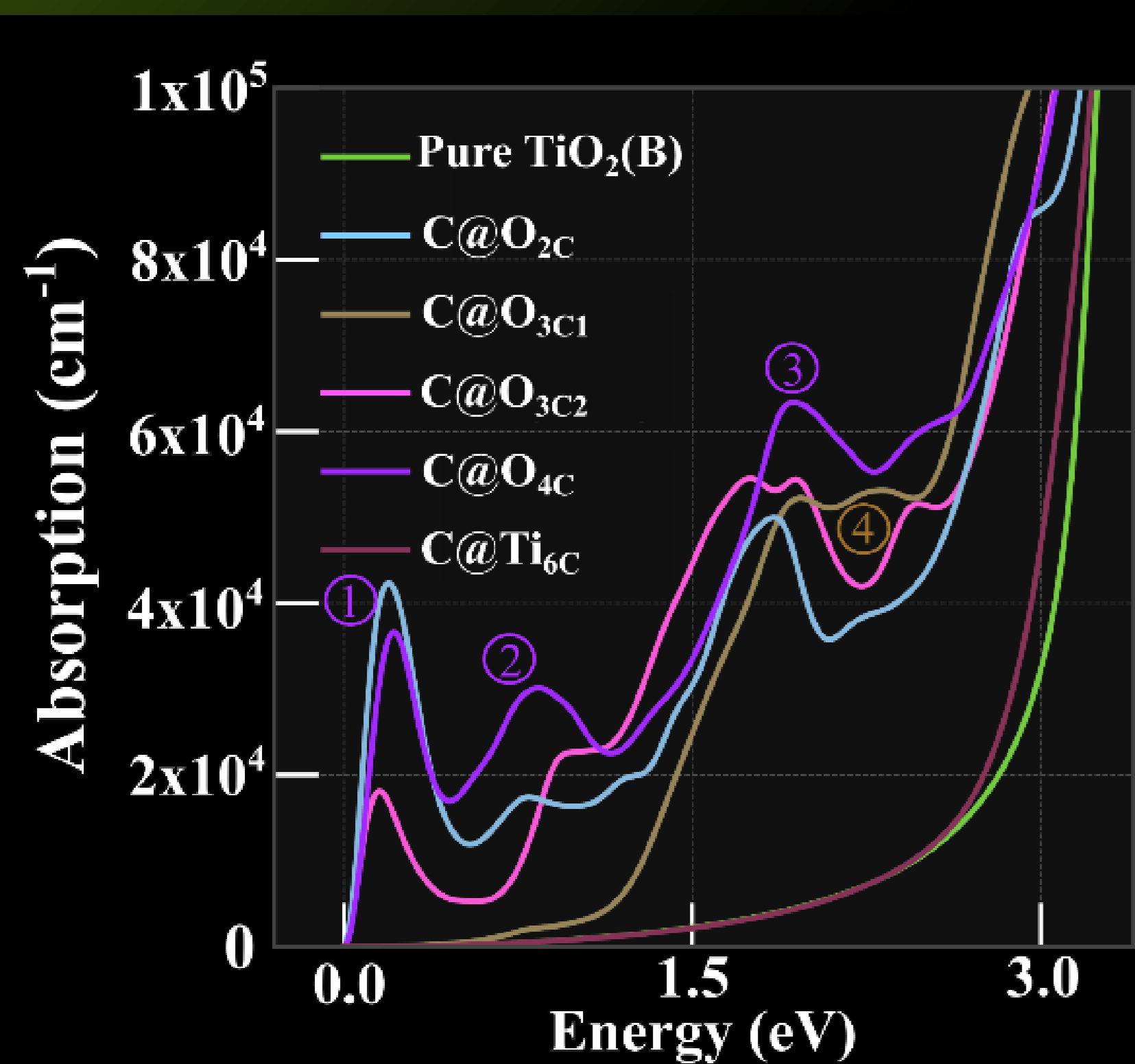


Densidad de estados  
Estructura de bandas  
Espectro de Absorción

## Resultados: Densidad de estados



## Resultados: Absorción



## Conclusión

El análisis de la densidad de estados y del espectro de absorción obtenidos sugiere que la incorporación de carbono en sitios ocupados por oxígenos incrementan de manera sustancial la absorción de luz, no solo por la generación de estados de impureza sino también por la disminución de la energía de banda prohibida. Para más detalles consultar la ref. [2].

## Agradecimientos

Los autores de este trabajo agradecen la financiación de SGCyT-UNS y CONICET, como así también los fondos provenientes de los programas uruguayos PEDECIBA-Química y CSIC-UdelaR.

## Referencias

- [1] F. Dong, S. Guo, H. Wang, X. Li, Z. Wu, *J. Phys. Chem. C*, 2011, **115**, 13285–13292.  
[2] H. Heffner, R. Faccio and I. López-Corral, *Appl. Surf. Sci.*, 2021, **551**, 149479.